

Mecânica Quântica – Série 3

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2009/2010

(Versão de 25/09/2009)

3.1 *Gasiorowicz 3.1*

*3.2 *Gasiorowicz 3.2*

*3.3 *Gasiorowicz 3.5*

*3.4 *Gasiorowicz 3.6*

3.5 *Gasiorowicz 3.7*

*3.6 *Gasiorowicz 3.9*

3.7 Os problemas em Mecânica Quântica, embora conceptualmente simples, são frequentemente difíceis devido às complicações dos cálculos. Isto faz com que na maioria dos exemplos sejam escolhidos casos muito simples. No entanto o programa **Mathematica** oferece uma ferramenta excelente para fazer contas em Mecânica Quântica. Para ilustrar isto vamos considerar novamente o problema anterior (*Gasiorowicz 3.9*).

a) Escreva um programa de **Mathematica** que tenha as funções de onda pares e ímpares. Notar que é preferível usar $(2m-1)$ e $2m$, respectivamente para as funções pares e ímpares, com $m = 1, 2, \dots$. A largura do poço também deve ser incluída. Assim as funções deverão ser

$$\text{uplus}[x, m, a], \quad \text{uminus}[x, m, a]$$

b) Verifique que as funções são ortonormadas, isto é,

$$\begin{aligned} \int_{-a/2}^{a/2} \text{uplus}[x, m, a] \text{uplus}[x, n, a] dx &= \delta_{nm}, \\ \int_{-a/2}^{a/2} \text{uminus}[x, m, a] \text{uminus}[x, n, a] dx &= \delta_{nm}, \\ \int_{-a/2}^{a/2} \text{uplus}[x, m, a] \text{uminus}[x, n, a] dx &= 0 \end{aligned}$$

c) Use essas funções para mostrar que os coeficientes da expansão

$$\psi(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} A_m^+ u_m^+(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^+ t} + \sum_{m=1}^{\infty} A_m^- u_m^-(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^- t}$$

têm a seguinte expressão

$$A_m^+ = -\frac{2(-1)^m}{(2m-1)\pi}, \quad A_m^- = \frac{-1 + (-1)^m}{m\pi}$$

d) Utilize estes resultados para mostrar que a probabilidade de encontrar a partícula vai oscilar com o tempo. Para isso é conveniente parametrizar o tempo nas exponenciais da seguinte forma

$$e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^+ t} = e^{-i\theta(2m-1)^2}, \quad e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^- t} = e^{-i\theta(2m)^2}$$

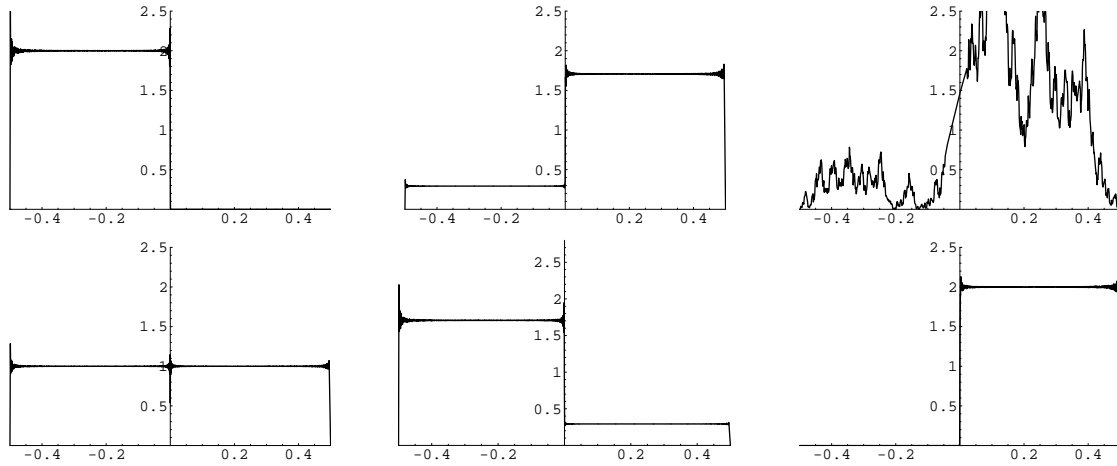


Figure 1: Densidade de probabilidade $|\psi(x,t)|^2$ no intervalo $[-0.5, 0.5]$ num poço de potencial com $a = 1$ para $\theta = 0, \pi/4, 1, \pi/2, 3\pi/4, \pi$. $\psi(x,t)$ foi obtida somando 500 termos na expansão.

onde

$$\theta = \frac{\pi^2 \hbar^2 t}{2ma^2 \hbar}$$

é um ângulo sem dimensões.

Notar que se somar menos termos na expansão haverá um erro maior no resultado como se pode ver na figura seguinte

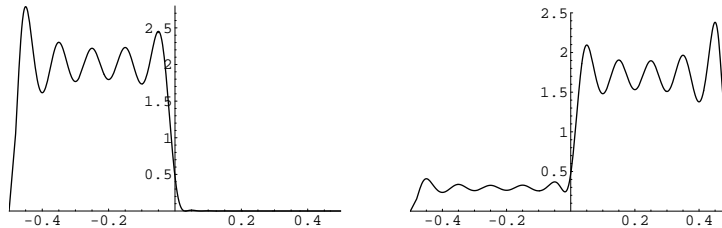


Figure 2: Densidade de probabilidade $|\psi(x,t)|^2$ no intervalo $[-0.5, 0.5]$ num poço de potencial com $a = 1$ para $\theta = 0, \pi/4$. $\psi(x,t)$ foi obtida somando 10 termos na expansão. Comparar com a Figura 1.

e) Use os resultados anteriores para verificar o problema *Gasiorowicz 3.10*. Notar que há uma gralha no enunciado. A expressão correcta é

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}$$

*** 3.8** Uma partícula num poço infinito de potencial encontra-se inicialmente numa “mistura” dos primeiros dois estados estacionários:

$$\Psi(x, 0) = A [u_1(x) + u_2(x)].$$

- a) Normalize $\Psi(x, 0)$ (i.e., determine a constante A real e positiva – isso é fácil quando se utilizar a ortogonalidade de u_1 e u_2 .)
- b) Determine $\Psi(x, t)$ e $|\Psi(x, t)|^2$; escreva a densidade da probabilidade como função sinusoidal do tempo, usando $\omega \equiv \pi^2 \hbar / 2ma^2$.
- c) Calcule $\langle x \rangle$. Repare que oscila no tempo. Qual é a frequência angular e a amplitude da oscilação?
- d) Calcule $\langle p \rangle$ (da maneira mais rápida).
- e) Quando a energia é medida, quais são os valores *possíveis* que se podem obter, e quais são as probabilidades respectivas? Calcule também o valor expectável de H e compare com as energias E_1 e E_2 .

3.9 Use o *Mathematica* para visualizar os resultados do problema anterior. Para isso

- a) Faça o gráfico de $|\Psi(x, t)|^2$ para $\omega t = 0, \pi/12, \pi/6, \pi/4, \pi/3$.
- b) Faça o gráfico de $\langle x \rangle$ para os mesmos valores de ωt .
- c) Calcule $\langle p \rangle$ através da definição:

$$\langle p \rangle = \int_0^a dx \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

utilizando o *Mathematica* para fazer os integrais.

*** 3.10** *Gasiorowicz 3.11*

3.11 *Gasiorowicz 3.14*

*** 3.12** *Gasiorowicz 3.16*

3.13 *Gasiorowicz 3.17*

3.14 *Este problema é o Exemplo 3.5 do Gasiorowicz aumentado.*

Considere uma partícula na caixa da qual se conhece a função de onda em $t = 0$,

$$\psi(x) = \begin{cases} A \frac{x}{a} & 0 < x < a/2 \\ A \left(1 - \frac{x}{a}\right) & a/2 < x < a \end{cases} \quad (1)$$

onde $A = \sqrt{12/a}$. Nas alíneas seguintes utilize o *Mathematica*.

- a) Mostre que $\psi(x)$ está normalizada.
- b) Determine coeficientes da expansão A_n .
- c) Calcule $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ e $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

- d) Calcule a função de onda no espaço dos momentos e mostre que está normalizada.
Faça um gráfico de $|\phi(p)|^2$.
- e) Calcule $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ e $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$
- f) Verifique que $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.
- g) Calcule o valor médio da energia $\langle H \rangle$.